



ACADEMIA ROMÂNĂ

SCOSAAR

REZUMATUL TEZEI DE ABILITARE

TITLUL Procese fizico-chimice sub nanorestrângere

Domeniul de abilitare: *Chimie*

Autor: Dr.ing. Raul-Augustin MITRAN

Rezumat

Teza de abilitare intitulată „Procese fizico-chimice sub nanorestrângere” prezintă cercetarea fundamentală și aplicativă efectuată după primirea titlului de doctor de la Universitatea „Politehnica” din București, 2012. Interesul față de acest domeniu este motivat de proprietățile pe care nanorestrângerea le are asupra diferitelor procese chimice și fizice. Silicea mezoporoasă ordonată a fost folosită ca matrice de nanorestrângere datorită mezoporilor cu diametru de 2 – 50 nm, ușurinței de a le modifica proprietățile prin sinteză, stabilității și caracterului netoxic. Cercetarea prezentată în această teză se concentrează atât pe cercetări fundamentale și aplicative sub paradigma „cercetării de frontieră”.

Teza este structurată în două secțiuni principale, urmate de bibliografie. Capitolul I prezintă contribuțiile originale în domeniu proceselor fizico-chimice sub nanorestrângere, iar Capitolul II discută cariera proprie profesională și planurile de dezvoltare a carierei. Contribuțiile originale prezentate în Capitolul I sunt argumentate folosind articole ISI publicate ca autor principal.

Capitolul I este structurat în trei părți, fiecare corespunzând unui set de procese fizico-chimice sub nanorestrângere și aplicațiile acestora. Subcapitolul I.1. discută motivarea domeniului ales. Subcapitolul I.2. „Procese de adsorbție și desorbție sub nanorestrângere” adună cercetările din acest domeniu, concentrate pe aplicații de sisteme cu eliberare controlată de medicamente. Studiile s-au axat pe explicarea adsorbției și eliberării medicamentelor sub nanorestrângere prin modele teoretice și computaționale, de exemplu modelele cinetice și calculării înclinației formării legăturilor de hidrogen. Influența factorilor nanorestrângerii asupra acestor proprietăți au fost investigate folosind o moleculă model folosită împotriva bolilor cardiovasculare. O strategie de control a desorbției prin introducerea unui excipient ternar a fost propusă și demonstrată. Efectul unor „nano-rotori” activi pe bază de azobenzen cu răspuns la stimuli externi și comutarea balanțului hidrofilic – hidrofobic a suprafeței asupra procesului de desorbție a fost discutată. Influența găsirii unor grupe organice cu potențial de interacție cu moleculele „oaspete” prin forțe supramoleculare asupra nanorestrângerii a fost investigată folosind un compus antioxidant natural.

Subcapitolul I.3. „Tranziții de fază sub nanorestrângere” prezintă studierea influenței nanorestrângerii asupra tranzițiilor de fază de tipul solid – lichid. Această tranziție este de interes pentru crearea de nanocompozite ce pot stoca căldură latentă, denumite materiale cu schimbare de fază. Înainte de studiile raportate în aceasta teză, doar densități mici de energie termică ($<80 \text{ Jg}^{-1}$) au fost obținute folosind silice mezoporoasă. Existența unui strat amorf de interfață ce nu se topește între matricea mezoporoasă și faza activă de stocare de energie termică a putut explica acest fapt. Nanocompozite cu interval de stocare termic dual au fost obținute și un model teoretic al stratului amorf a fost construit pentru a quantifica influența acestuia asupra proprietăților termice ale probelor. Cele mai folosite silici mezoporoase, MCM-41 și SBA-15, nu sunt potrivite pentru această aplicație. Spumele mezocelulare, ce maximizează raportul volum/suprafață sunt cele mai bune matrici. Influența metodelor de sinteză asupra proprietăților termice au fost investigate. Funcționalizarea silicei mezoporoase cu diverse grupări organice a putut scădea volumul ocupat de stratul amorf în cazul prezenței forțelor atractive supramoleculare între suprafața matricei și materialul cu schimbare de fază aflat sub nanorestrângere. Stocarea de căldură la temperaturi

creșcute (200 – 600 °C) este foarte relevantă în contextul stocării continue și eficiente a energiei solare. Folosirea sărurilor topite ce conțin cationi metalici din grupa 2 a condus la reacții cu matricea de silice. Cu toate acestea, o astfel de strategie a matricilor reactive a putut fi folosită pentru crearea de materiale de stocare a energiei termice la 500 °C. Un amestec eutectic de săruri topite cu 2 componente, NaNO_3 și KNO_3 , a rezultat în materiale cu schimbare de fază și formă stabilizată cu interval dublu de stocare de căldură, folosind matrici cu diametru mare al porilor. O parte a capacității de stocare de căldură s-a pierdut, indicând procese similare stratului amorf. Folosirea unui amestec eutectic ternar nu a rezultat în adsorbția înăuntru mezoporilor. Frații masice de până la 90 % au fost stabilizate prin nanorestrângere în spațiul dintre particulele matricei. Dopparea silicei cu Al^{3+} a generat sarcini pozitive ce pot interacționa cu sărurile topite nanorestrânse. Această interacție poate înlătura complet pierderea de capacitate de stocare prin adsorbția ionilor pe suprafața matricilor, crește volumul fazei nanorestrânse, conducând la o performanță de stocare de energie termică mai bună.

Subcapitolul I.4. „Alte contribuții la studiul proceselor sub nanorestrângere” prezintă un studiu al creșterii stabilității termice a SBA-15 prin restrângerea nanoparticulelor de CeO_2 , permițând aplicații catalitice la temperaturi de 700 °C. Alt studiu prezintă folosirea unui material de tip carbon poros ca matrice reactivă pentru sinteza unei faze termodinamic instabilă de semicarbură de tungsten la temperaturi semnificativ mai mici decât ruta directă.